cbecimat26
26° Congresso Brasileiro de Engenharia e Ciência dos Materiais
22 a 26 de novembro de 2026
Costão do Santinho
Florianópolis-SC

Efeitos das vacâncias de oxigênio e espessura nas propriedades dos filmes nanocristalinos de γ-Ga_2O_3

Melissa Naomi Takemori Barbosa[1], Ângelo Gobbi[2], Itamar Tomio Neckel[2], José Varalda[3], Dante H. Mosca[1,3], Juliana Zarpellon[1]

[1]Programa de Pós-Graduação em Engenharia e Ciência dos Materiais (PIPE), Universidade Federal do Paraná; [2]Centro Nacional de Pesquisa em Energia e Materiais (CNPEM); [3]Programa de Pós-Graduação em Física (PPGFis), Universidade Federal do Paraná

Introdução

O óxido de gálio (Ga_2O_3) é um material semicondutor que possui um wide-bandgap (WBG) de 4.9 eV. Possuindo seis polimorfos, com diferentes estruturas cristalinas, a fase γ, embora metaestável, pode ser estabilizada sob condições específicas de fabricação, o que motiva esse estudo. Ela apresenta uma estrutura cúbica espinélio (AB_2O_4) defeituosa (Fig. 1. a) , com vacâncias de oxigênio nos sítios octaédricos e/ou tetraédricos, o que a torna ferromagnética à temperatura ambiente. Isso torna esse material promissor para o seu uso em dispositivos spintrônicos, como dispositivos de memória magnética de acesso aleatório (MRAM), além de dispositivos opto-spintrônicos em que ocorre a conversão de informação ótica em elétrica/magnética, e vice-versa, como spin-LEDs.

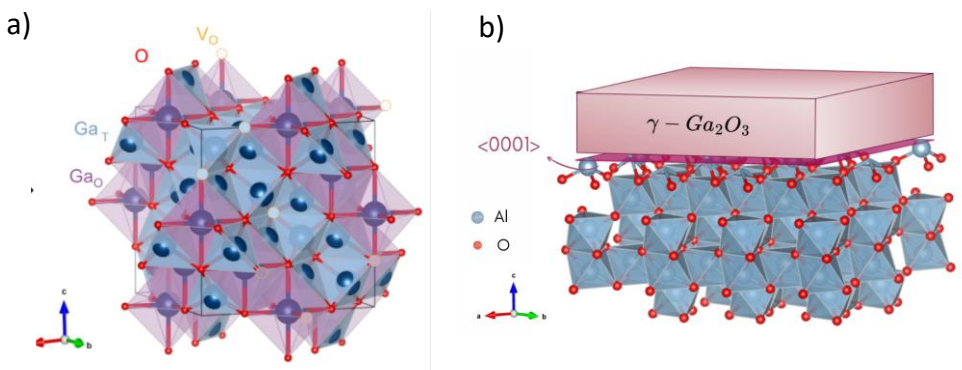


Fig. 1. a) Célula unitária cúbica de γ-Ga_2O_3 b) Célula unitária hexagonal da safira Al_2O_3 com uma camada de γ-Ga_2O_3.

Objetivos

Estudar filmes finos de γ-Ga_2O_3 crescidos sob diferentes condições experimentais, buscando estabelecer relações entre parâmetros de deposição, microestrutura e suas propriedades físicas e estruturais

Metodologia

A fabricação dos filmes finos de γ-Ga_2O_3 foi realizada por meio da técnica de deposição física de vapor assistida por feixe de elétrons (EB-PVD), no LNNano. Para os filmes desse trabalho foram utilizados substratos cristalinos de safira (Al_3O_3) com orientação <0001> (Fig. 1.b), determinante para a estabilização da γ- Ga_2O_3 . As amostras foram preparadas em uma pressão de 1 e 8 mPa, com espessuras em um intervalo de 1,2 nm a 20,0 nm.

Resultados e Discussão

A estrutura cristalina foi investigada por difração de raios X (DRX), à temperatura ambiente, na UFPR. Com desalinhamento de $\Delta\Psi = -0{,}05°$, foi identificada a fase γ-Ga_2O_3 (Fig. 2).

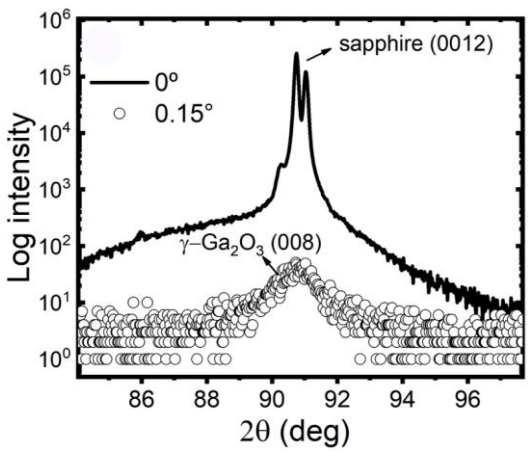
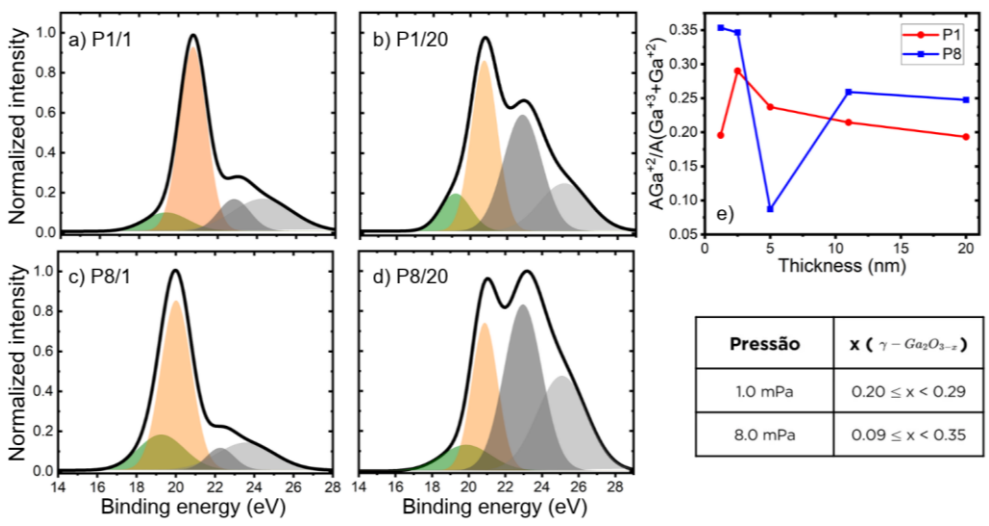


Fig. 2. Difratograma da amostra de espessura de 20,0 nm com um desalinhamento de -0,05º.

As medidas de XPS (LNNano) foram utilizadas para investigar os estados de oxidação do Ga. Os espectros (Fig. 3 a-d) apresentam sinais de Ga^{3+} (laranja), Ga^{2+} (verde) e O 2s/Ga–O (cinza), permitindo estimar a estequiometria do filme pela razão entre as áreas de Ga^{3+} e Ga^{2+} (Fig. 3 e).



Pressão	x ($\gamma - Ga_2O_{3-x}$)
1.0 mPa	0.20 ≤ x < 0.29
8.0 mPa	0.09 ≤ x < 0.35

Fig. 3. Espectro da região Ga 3d das amostras de pressão de 1 mPa com esoessuras a) 1 nm e b) 20 nm e depressão 8 mPa de c)1 nm e d) 20 nm e e) a razão entre as áreas dos íons de gálio.

A espectroscopia de fotoluminescência (PL), realizada na UFPR, foi utilizada para investigar a emissão na região UV (Fig. 4 a) e o deslocamento do band gap para menores energias (Fig. 4 b), associado à concentração de vacâncias na célula unitária, fenômeno que pode ser investigado por simulações DFT.

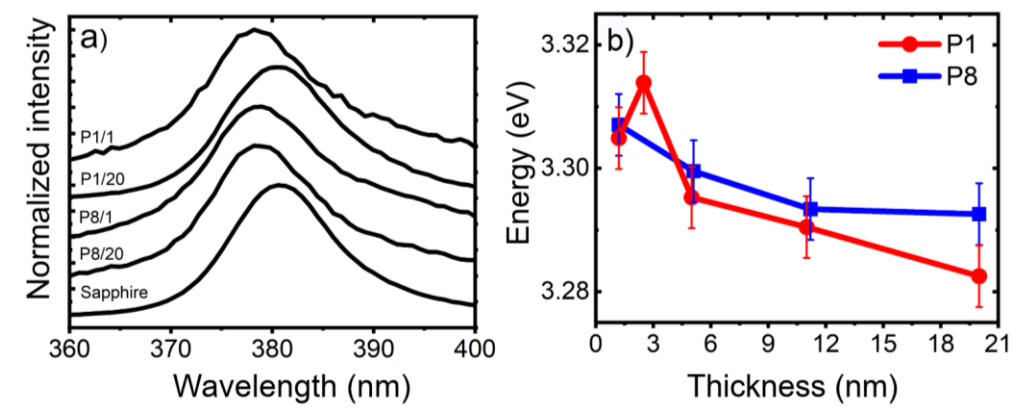


Fig. 4. a) Espectro de PL para as espessuras extremas de cada pressão e b) a variação da energia em relação a espessura.

Conclusões

Filmes nanocristalinos de γ-Ga_2O_3 foram estabilizados sobre substrato de safira (c-plane), apresentando orientação preferencial. As análises evidenciaram estados de oxidação do Ga e deficiência de oxigênio. A combinação dos resultados de fotoluminescência (PL) sugere uma transição de estados associados a vacâncias isoladas de oxigênio.

Referências e Agradecimentos

PICHORIM, A. *et al.* Non-stoichiometric gallium oxide with cubic structure directly integrated to C-Cut sapphire. **Materials Science in Semiconductor Processing**, v. 139, 1 mar. 2022a.

PICHORIM, A. *et al.* Room temperature ferromagnetism in oxygen-deficient gallium oxide films with cubic spinel structure. **Materials Chemistry and Physics**, v. 287, 1 ago. 2022b.

TAK, B. R. *et al.* **Recent advances in the growth of gallium oxide thin films employing various growth techniques - A review**. **Journal of Physics D: Applied Physics**IOP Publishing Ltd, , 1 nov. 2021.